開放化学反応系への reductive pertunbtion approach

九大理　　蔵　本　由　紀

熱平衡から遠く離れた非平衡定常系における相転移現象，及び新しい相における散逸構造の特質を鮮明に把握する為に reductive perturbation の方法[1]を化学反応系に適用することを試みる。熱平衡状態における相転移はしばしば次のような time - dependent GL 方程式で記述される。

$$\frac{\partial w}{\partial t} = (T_c - T)\,w + D\nabla_r^2 w - \beta |w|^2 w. \qquad (1)$$

開放系においても種々の系に対してこれを類似な式が不安定点近傍で導かれるだろうか。Newell - Whitehead[2]はかって reductive perturbation を，Bénard 現象に適用して(1)の型を導いた。その場合 w は速度場又は温度場のゆらぎに対応する。(1)のような式はもとの運動方程式，たとえば Bénard 現象の場合には一組の流体方程式から不安定点近傍で本質的な部分を引出し不必要な部分を捨て去ることによって得られる。(1)式を $R = \varepsilon r$，$T = \varepsilon^2 t$，$W = \varepsilon^{-1} w$，$\varepsilon \equiv |T - T_c|^{\frac{1}{2}}$ のようなスケール変換によって書き直すと

$$\frac{\partial W}{\partial T} = \pm W + D\nabla_R^2 W - \beta |W|^2 W \qquad (2)$$

となる。この式は明らかにあらわに ε に依存していない。このことはもとの運動方程式から不安定点近傍で漸近的に成立つ式を導出する場合の一般的な考え方を示唆している。即ち，時間，空間及び振巾の適当なスケール変換に対して運動方程式が不換であるような部分が本質的であり，それをうまく引き出せばよいわけである。開放系の不安定点近傍では必ずしも(1)の型に reduce されるとは限らない。しかしながら不安定点近傍では小さなパラメター ε が存在し，それを用いてスケール不変な部分を引出し，意味のある新しい式を導くという考え方は広い適用範囲をもっていると思われる。

例として次のような化学反応系を考える。

$$
\begin{aligned}
A &\rightarrow X \\
2X + Y &\rightarrow 3X \\
B + X &\rightarrow Y + D \\
X &\rightarrow E .
\end{aligned}
\tag{3}
$$

これは Prigogin, Nicoeis 達[3] によっていろいろ調べられているもので，開放化学反応等の散逸構造を調べる為にははなはだ便利なモデルである。しかし不安定点より上の新しい状態については解析的には殆んど手がつけられていなくて，もっぱら数値実験に頼っているのが現状であるが，以下で見るように reductive perhurbation を用いるとこれがかなり解析的に扱えるのである。以下では無限に長い一次元系を考えよう。簡単のため反応速度定数はすべて 1 とする。また A, B, D, E の濃度は時間的空間的に一定に保たれているとする。拡散過程を考慮すると局所的な濃度 X(r)，Y(r) の時間変化は次式で記述される。

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial X}{\partial t} &= A + X^2 Y - BX - X + D_x \nabla_r^2 X , \\
\frac{\partial Y}{\partial t} &= BX - X^2 Y + D_y \nabla_r^2 Y 。
\end{aligned}
\tag{4}
$$

但し D_x，D_y は拡散定数。上式から定常解として

$$
X_s = A , \qquad Y_s = B / A \tag{5}
$$

が存在することがわかる。これは熱平衡状態と連続的につながっている状態つまり thermodynamic branch である。状態(5)の安定性をしらべるために $X = X_s + x$，$Y = Y_s + x$，$Y = Y_s + y$ とおいて(4)に代入し，x，y について線型化し，更に $x, y \sim e^{\omega t + ikr}$ とおいて分散方程式を作ると

$$
\begin{aligned}
&\omega^2 + \{ A^2 + 1 - B + (D_x + D_y) k^2 \} \omega \\
&\qquad + A^2 (1 + D_x k^2) + (1 - B) D_y k^2 + D_x D_y k^4 = 0
\end{aligned}
\tag{6}
$$

を得る。Bをパラメターと考え，この値を次第にましてゆくとある点 $B = B_c$ で不安定が起るが，これには２つの可能性がある。即ち

Ⅰ. $B_c(1+A\eta)^2$, $\eta\equiv(D_x/D_y)^{\frac{1}{2}}$。この場合一様な状態(5) は空間的に周期的な摂動 $e^{ik_c r}$ に対して不安定となる。但し $k_c=\pm(A/\bar{D})^{\frac{1}{2}}$, $\bar{D}\equiv(D_x D_y)^{\frac{1}{2}}$。

Ⅱ. $B_c=1+A^2$。この場合空間的には一様で時間的に周期的な摂動 $e^{\pm iAt}$ に対して不安定となる。即ち(6)は $\mathrm{Re}\,\omega=0$ $\mathrm{Im}\,\omega=\pm A$ の解をもつ。

どちらの型の不安定が起るかは上の2つの B_c の大小関係で決まる。つまり，$\eta<A^{-1}\{(1+A^2)^{\frac{1}{2}}-1\}$ ならⅠ，逆の場合にはⅡの不安定が起る。これら2つの場合に対して reductiue perturbationを適用し，(4)式を適当に reduce して不安定点近傍で成立つ式を求めると結果は次のようになる。$\varepsilon^2=|B-B_c|/B_c$ として，

Ⅰ. $x=\varepsilon(we^{ik_c r}+\mathrm{c.c.})+0(\varepsilon^2)$, $y=-\varepsilon A^{-1}\eta(1+A\eta)\times(we^{ik_c r}+\mathrm{c.c.})+0(\varepsilon^2)$ とおくと，

$$\frac{\partial w}{\partial t}=(B-B_c)\frac{1+A\eta}{1-A^2}w+\frac{4\eta\bar{D}}{(1+A\eta)(1-\eta^2)}\nabla_r^2 w-F(A,\eta)|w|^2 w, \tag{7}$$

$$F(A,\eta)=(-8+38A\eta+5A^2\eta^2-8A^3\eta^3)/9A^3\eta(1-\eta^2).$$

Ⅱ. $x=\varepsilon(we^{iAt}+\mathrm{c.c.})+0(\varepsilon^2)$, $y=-\varepsilon\{(1-\frac{i}{A})\times we^{iAt}+\mathrm{c.c.}\}+0(\varepsilon^2)$ とおくと，

$$\frac{\partial w}{\partial t}=(B-B_c)\frac{1+A^2}{2}w+(D_+-iAD_-)\nabla_r^2 w$$
$$-\frac{1}{2}\left(\frac{1+A^2}{A^2}+i\frac{4-7A^2+4A^4}{3A^3}\right)|w|^2 w, \tag{8}$$

$$D_\pm=\frac{1}{2}(D_x\pm D_y)。$$

どちらの場合にもTDGL 型の方程式が得が得られた。$B>B_c$ の場合を考えると，Ⅰでは $F>0$ なら，$w=\mathrm{const.}$ が安定な定常解である。これはX，Y の濃度が一様部分プラス空間的に波数 k_c で周期的に変化している部分から成るパターンを示している。$F<0$ なら(7)は物理的な解をもたない。つまり reductive perturbation の方法が破れる場合である。Ⅱでは $w=\rho e^{i\varphi}$ とおくと $\rho=\mathrm{const}$, $\varphi=\alpha t+\varphi_0$ $\alpha=0(\varepsilon^2)$ が定常解となる。これはX－Y 平面上でのリミットサイクルをあらわす解である。但しこの解は常に安定とは限らない。これは(8)式にあらわれる係数が一般には実数でないことによっている。(8)式がこれ以外の安定な解をもちうるかどうか現在検討中である。

蔵本由紀

参　考　文　献

1) T. Taniuti and C.C. Wei, J. Phys. Soc. Japan 24 (1968), 941.

2) A.C. Newell and J.A. Whitehead, J. Fluid Mech. 38 (1969), 279.

3) P. Glansdorff and I. Prigogine, "Thermodynamicm Theory of Structure, Stability and Fluctuations" (Interscience, New York, 1971), Part Ⅲ.

興奮の伝播と興奮性膜の形成過程

北大・薬　　相沢洋二，小畠陽之助

§1. はじめに

興奮現象は興奮ドメインと静止(非興奮)ドメインの間に生じる渦電流により誘起される広い意味の相転移(散逸的構造)である。この強い散逸的な相互作用をぬきにしは膜の興奮性機能を議論する事は出来ない。この小論の目的は，rate equation によって膜系に於ける渦電流の働きを明きらかにする事である。そのために二つの現象に注目する。一つは神経内の興奮の伝播であり，他の一つは興奮性をもたない膜が興奮性機能を有する膜に進化してゆく現象である。

§2. 興奮の伝播

膜上に分布している active domain の中で興奮しているドメインの割合をPとし，膜間電位差をVとする。この二つの変数によって興奮現象は記述される。興奮の基礎方程式を神経細胞にそって一次元であると近似する。興奮の rate. $\frac{dP}{dt}$ および膜電位の時間変化は次の式で与えられる。

$$dP/dt = k_1(V-V_c)P(1-P) - k_2 P\cdot\int_{-\infty}^{t}(V_{(t')}-Er)\,e^{-\frac{t-t'}{T}}dt' + k_3\frac{\partial V}{\partial x^2} \qquad (1)$$

$$dV/dt = \frac{-1}{c}\left\{P g_a(V-Ea) + (1-P)g_r(V-Er)\right\} + k_4\frac{\partial^2 V}{\partial x^2} \qquad (2)$$

ここで，$k_1 \sim k_4$ は rate const. Er, g_r (or Ea, g_a) は静止(or 興奮) ドメイ